

This Page Is Inserted by IFW Operations  
and is not a part of the Official Record

## **BEST AVAILABLE IMAGES**

Defective images within this document are accurate representations of the original documents submitted by the applicant.

Defects in the images may include (but are not limited to):

- BLACK BORDERS
- TEXT CUT OFF AT TOP, BOTTOM OR SIDES
- FADED TEXT
- ILLEGIBLE TEXT
- SKEWED/SLANTED IMAGES
- COLORED PHOTOS
- BLACK OR VERY BLACK AND WHITE DARK PHOTOS
- GRAY SCALE DOCUMENTS

**IMAGES ARE BEST AVAILABLE COPY.**

**As rescanning documents *will not* correct images,  
please do not report the images to the  
Image Problem Mailbox.**

**THIS PAGE BLANK**

**THIS PAGE BLANK (USP)**

(19)日本国特許庁(JP)

(12) 公開特許公報(A)

(11)特許出願公開番号

特開平6-12398

(43)公開日 平成6年(1994)1月21日

(51)Int.Cl.<sup>5</sup>

G 0 6 F 15/20

識別記号

庁内整理番号

F I

技術表示箇所

D 7052-5L

審査請求 有 請求項の数7(全16頁)

(21)出願番号 特願平5-53957

(22)出願日 平成5年(1993)3月15日

(31)優先権主張番号 874475

(32)優先日 1992年4月23日

(33)優先権主張国 米国(US)

(71)出願人 390009531

インターナショナル・ビジネス・マシー  
ズ・コーポレーション

INTERNATIONAL BUSIN  
ESS MACHINES CORPO  
RATION

アメリカ合衆国10504、ニューヨーク州  
アーモンク(番地なし)

(74)代理人 弁理士 頻宮 孝一(外4名)

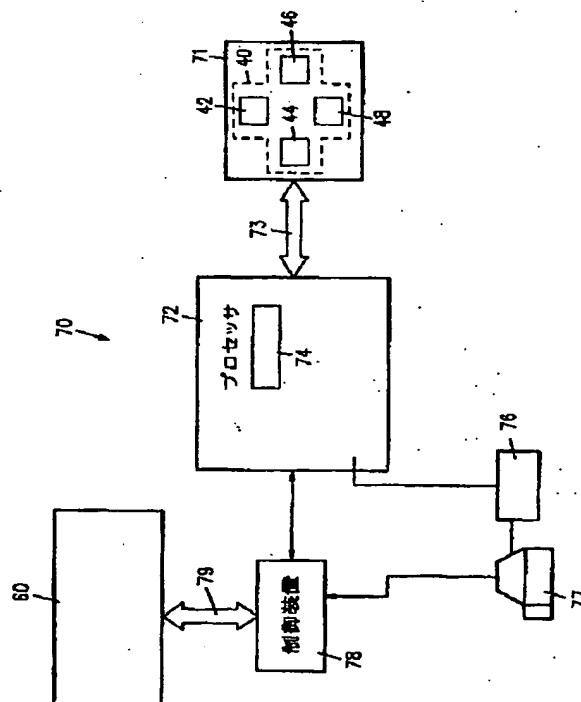
最終頁に続く

(54)【発明の名称】 空間分割型確率シミュレーション・システム

(57)【要約】

【目的】 空間的に不均一なシステムの正確なシミュレーション、予測、制御を行う確率的シミュレータを提供すること。

【構成】 少なくとも1つのデータ記憶装置71と接続された少なくとも1つのプロセッサ72を含むシミュレータ74は物質特性データ・グループ44、システム状態データ・グループ42、イベント確率データ・グループ46およびイベント・プロセス・データ・グループ48を備える。以上のデータ・グループおよびそれらのすべてを相関させ、物質エネルギー・システム60が明示的な複数次元データ構造を必要とせずこのようなデータ・グループを表すことのできる少なくとも1つの関数関係リンクが、データ記憶装置71に記憶される。プロセッサ72はシミュレーション・プロセスを実行する。



## 【特許請求の範囲】

【請求項1】 時間進行型物質エネルギー・システムのシミュレーションおよび制御の少なくとも一方を行うシミュレータ・システムであって、データ相関装置を備えた少なくとも1個のデータ記憶装置と、

幾何学的構成、システム状態、物質特性、物質エネルギー・プロセスおよび前記物質エネルギー・プロセスの発生確率を定義するために、前記データ記憶装置に記憶されるデータと、を具備し、前記データ相関装置は、前記データのすべてを相関させるために少なくとも1つの関数関係リンクを定義する機能を備えているシミュレータ・システム。

【請求項2】 請求項1記載のシミュレータ・システムであって、前記データ記憶装置から前記データを受信するためのデータ入力装置を備えた少なくとも1つのプロセッサをさらに備え、該プロセッサは前記データを相関させるために前記関数関係リンクを利用して、

(a) 可能な前記物質エネルギー・プロセスのそれぞれのイベント確率を計算し、前記幾何学的構成での前記物質エネルギーの確率のすべてを加算することによる総発生確率を使用してタイム・ステップを決定するステップと、

(b) 前記タイム・ステップの間に物質エネルギー・プロセス・イベントを無作為に選択し、前記物質特性のデータおよび前記幾何学的構成のデータを使って、前記の選択した物質エネルギー・プロセス・イベントの発生に起因する前記システム状態のデータを更新するステップと、

(c) 予め定めたシミュレーション終了時間に至るまで前記ステップ(a)および(b)を繰り返すステップと、を含むシミュレーション・プロセスを実行する装置を備えており、

さらに、前記プロセッサは、前記時間進行型物質エネルギー・システムの制御のため、ステップ(b)から得た前記の更新されたシステム状態を利用する機能を持った制御装置を備えているシミュレータ・システム。

【請求項3】 請求項1記載のシミュレータ・システムであって、前記データ記憶装置が前記データを記憶するための関係データベースをさらに備え、前記データ相関装置が関係データベース・マネージャを備えるシミュレーション・システム。

【請求項4】 時間進行型物質エネルギー・システムのシミュレーションおよび制御の少なくとも一方を行うシミュレーション・システムであって、少なくとも1つのデータ記憶装置と、サブボリューム・インデックス(INDX)によってそれぞれ識別される複数のサブボリュームを定義するために前記データ記憶装置に記憶されており、前記サブボリ

の複数のデータ・サブグループを含むシステム状態データ・グループと、

前記サブボリュームINDXによって識別される前記サブボリュームに含まれる複数の物質と該物質のそれぞれに対する複数の物質特性とを定義する複数のデータ・サブグループを含み、且つ前記データ記憶装置に記憶される物質特性データ・グループと、

前記サブボリュームINDXによって識別される前記サブボリュームのそれぞれでの前記システム状態の関数として、前記イベントの時間依存状態を定義するための関数をそれぞれ有する複数のイベントを定義し、且つ、前記データ記憶装置に記憶されるイベント・プロセス・データ・グループと、

前記サブボリュームでの前記システム状態および前記物質特性に応じて、前記サブボリュームのそれぞれでの前記イベントのそれぞれの発生確率を定義し、且つ、前記データ記憶装置に記憶されるイベント確率データ・グループと、

前記物質特性データ・グループ、前記システム状態データ・グループ、前記イベント・プロセス・データ・グループおよび前記イベント確率データ・グループのデータを前記データ記憶装置から受信するためのデータ入力装置と、

(a) 前記サブボリュームのそれぞれでの前記イベントのそれぞれに対する前記イベント確率を計算し、前記イベント確率のすべてを加算することによる総発生確率を使用して、タイム・ステップを決定するステップと、(b) 前記タイム・ステップに対するイベントを無作為に選択し、前記サブボリュームのそれぞれでの前記の選択したイベントの発生に起因するシステム状態を表す前記システム状態データ・グループを更新するために、前記の関連するサブボリュームのそれぞれに対する前記物質特性データ・グループを使用するステップと、(c) 予め定めたシミュレーション終了時間に至るまで、前記ステップ(a)および(b)を繰り返すステップとを含むシミュレーション・ステップを実行する装置と、

前記時間進行型物質エネルギー・システムの制御のためにステップ(b)で得られた前記の更新したシステム状態を利用する機能を有する制御装置とを備えた少なくとも1つのプロセッサと、を具備するシミュレータ・システム。

【請求項5】 請求項4記載のシミュレータ・システムであって、前記プロセッサが、前記タイム・ステップの少なくとも1つにおいて前記システム状態データ・グループを更新するために、前記物質エネルギー・システムからシステム状態データを受信するための少なくとも1つのデータ・ポートをさらに備えるシミュレータ・システム。

【請求項6】 空間的に不均一な確率的シミュレータにデータ構造を提供する方法において、

X)、サブボリューム・システム状態データおよび少なくとも1個の物質特性識別子(ID)によって識別される複数のサブボリュームを含むシステム状態データを生成するステップと、

前記複数のサブボリュームに含まれる物質の特性を含む物質特性データを生成するステップと、

前記サブボリュームINDEXによって識別される前記サブボリュームのそれぞれに、前記システム状態の関数として前記イベントの時間依存状態を定義するための関数をそれぞれ有する複数のイベントを定義するためのイベント・プロセス・データを生成するステップと、

前記サブボリュームにおける前記システム状態および前記物質特性に応じて、前記サブボリュームのそれぞれでの前記イベントのそれぞれに対する発生確率を定義するためのイベント確率データを生成するステップと、

データ記憶装置に、前記システム状態データ、前記物質特性データ、前記イベント・プロセス・データおよび前記イベント確率データを記憶するステップであって、前記サブボリュームINDEXおよび前記物質特性識別子

(ID)が前記データのすべての間の対応を与えるステップと、を含む方法。

【請求項7】 コンピュータ上で実行可能なプログラムを使用することにより、時間依存型物質エネルギー・システムをシミュレートする方法において、

(a) サブボリューム・インデックス(INDEX)、システム状態データ・サブグループおよび少なくとも1つの物質特性識別子(ID)によってそれぞれが識別される複数のサブボリュームを含むシステム状態データ・グループを生成するステップと、

(b) 前記の関連するサブボリュームINDEXによって識別される前記サブボリュームに含まれる物質特性を定義するための複数のデータ・サブグループを含む物質特性データ・グループを生成するステップと、

(c) 前記サブボリュームINDEXによって識別される前記サブボリュームのそれぞれに対して、前記システム状態の関数として前記イベントの時間依存状態を定義するための関数をそれぞれ有する複数のイベントを定義するためのイベント・プロセス・データ・グループを生成するステップと、

(d) 前記サブボリュームでの前記システム状態および前記物質特性に応じて、前記サブボリュームのそれぞれでの前記イベントのそれぞれに対して発生確率を定義するためのイベント確率データ・グループを生成するステップと、

(e) データ記憶装置に前記システム状態データ・グループ、前記物質特性データ・グループ、前記イベント・プロセス・データ・グループおよび前記イベント確率データ・グループを記憶するステップであって、前記サブボリュームINDEXおよび前記物質特性識別子(ID)

テップと、

(f) 前記サブボリュームのそれぞれでの前記イベントのそれぞれの前記イベント確率を計算し、前記イベント確率のすべてを加算することによる総発生確率を使用してタイム・ステップを決定するステップと、

(g) 前記タイム・ステップの間にイベントを無作為に選択し、前記サブボリュームのそれぞれでの前記の選択したイベントの発生に起因するシステム状態を表す前記システム状態データ・グループを更新するために、前記の関連するサブボリュームのそれぞれに対する前記特性データ・グループを使用するステップと、

(h) 予め定めたシミュレーション終了時間に至るまで前記ステップ(f)および(g)を繰り返すステップと、を含む方法。

【発明の詳細な説明】

【0001】

【産業上の利用分野】 本発明は、一般的には、時間進行型物質エネルギー・システムのシステム性能のシミュレーション、予測または制御を行う機能を備えたシミュレータに関するものである。さらに特定すると、本発明は、オンライン・コンピュータ・システムにより実現されるデータ記憶容量ならびに処理能力を活用し、空間的に不均一なシステムのリアルタイムでのシミュレーション、予測または制御を実行する確率的シミュレータを教示するものである。

【0002】

【従来の技術】 高度に動的かつ複雑なシステム用のシミュレータは設計やトレーニングに限って有用となることがあるが、それがリアルタイム制御に使用されることはまれである。本質的な限度が存在するのである。つまり、多くの場合にシミュレータがシステムの伝搬に要する処理時間が、シミュレーションが行われるシステムで発生する実際のイベントの発生速度より遅いため、シミュレータのリアルタイムでの使用が妨げられる。

【0003】 シミュレータがほとんどの場合「システムに特殊な」ものである、つまり、あるシミュレータはある種の幾何学的構成、物質の構成要素、物理的または化学的なプロセス、および非常に柔軟性が限定された動的な特性だけを持つシステムのシミュレーションを行うように構築されているという事実により、従来のシミュレータの有用性も限定されている。元来、特定のシステムのシミュレーションを行うためにある種のハードウェアとソフトウェアとを組み合わせるよう設計されているシミュレータは、通常そのデータ構造と操作のプロセスにおいて非常に硬直しているので、違うシステムのシミュレーション、または異なった組み合わせのハードウェアとソフトウェアのアーキテクチャの実施を行うようにシミュレータを容易に変換することは不可能である。分散型並列並行データ処理の速度と性能を拡張す

一般化し、データ記憶装置ならびにコンピュータ・ネットワークの容量が増大するにつれ、硬直したデータ構造ならびに柔軟性を欠いたシミュレーション・プロセスは、現代の電子/コンピュータ産業によって実現された、このように増強されたデータ処理能力とデータ記憶容量とをシミュレータの技術が利用するのを阻む重大な障害となっている。

【0004】時間依存型物質エネルギー・システムの状態のシミュレーションと予測を行うためのシミュレータは、いくつかの理由から非常に扱いが難しく、時間がかかる装置である。従来、複雑かつ動的に相互作用する一連の微分方程式を含むことが多い数式が、さまざまなシステム条件下で発生する多様な時空依存型プロセスを明示的に表すために使用される。この場合、明示的にとは、システム全体を表すのに必要になると予め決定された情報のすべてがシミュレーションの各タイム・ステップに対して活動的に決定されるという意味である。これを行うために、シミュレータは有限差分法または有限要素法を用いて数値解を求めることで、この一連の微分方程式を解くためのプロセスを実行する。特に、複雑なシステムの場合、シミュレーションおよび予測の誤りは、有限差分法または有限要素法が原因となる近似エラー、または、微分方程式がシステム全体にわたってすべての位置において常時システム動作を正確に表してはいない可能性があるという事実のどちらかから生じることとなる。

【0005】時間依存型の物質エネルギー・システムを数学上の解法プロセスとして処理する代わりに、確率的シミュレータが開発された。確率的シミュレータは、シミュレーション期間に発生する可能性のある一連の個別のイベントを継続的かつ動的に追跡することによって動作する。シミュレータは、それぞれのイベントには或る特定の時点でシステムの条件と物質の特性とによって決定される一定の発生確率があるということを前提としている。一般的にはタイム・ステップと呼ばれる予め定めたタイム・ウィンドウ内で、シミュレートされたイベントの任意の1つが発生する可能性がある。平均的には、タイム・ステップの長さが全イベントの総発生確率の逆関数と等価となるように選択する場合、1タイム・ステップ内で1つのイベントが1回発生する。そのタイム・ステップ内での特定のイベント発生の尤度は、その個別のイベントの発生確率に比例する。一般的に、確率的シミュレータは、タイム・ステップを定義してから、そのタイム・ステップのトリガ・イベント (triggering event) として1つのイベントを無作為に選択する機能を備えた少なくとも1つのプロセッサを具備する。イベントが無作為に選択される可能性は、他のイベントの発生確率に対する選択されたイベントの発生確率に比例する。選択されたイベントが発生した結果、

される物質の特性テーブル、システム・プロセスの等式その他の必要なデータ・グループを使用することにより、システム状態を更新する。その後に、プロセッサは、システム・シミュレーション期間全体を通してシステムを伝搬する目的で、新しいタイム・ステップを選択し、イベント選択プロセスおよびシステム状態更新のプロセスを繰り返す。

【0006】確率的シミュレータは、初め、多くの化学反応が発生する空間的に均一な化学システムのシミュレーションを行うために使用された (D. L. バンカー (Bunker) 他、コンバッション・アンド・フレイム、1974年、第23巻、373ページff)。個々の化学反応の確率は、さまざまな化学反応物の濃度に依存している。関数の依存関係と濃度は、記憶装置内に記憶される。プロセッサは、乱数を生成して各タイム・ステップにさまざまな化学反応の中から特定の化学反応を選択し、シミュレーションの時間内での伝搬を可能にする。タイム・ステップの長さを決定するための時間基準は、全反応の確率の総和に基づいている。この種のシミュレータの2つの特殊な具体例については、シミュレータ293とシミュレータQCMP069として、量子化学プログラム交換 (インディアナ大学) で入手可能な文書に説明されている。

【0007】バンカー等によるシミュレータによって実行されるタスクは、付属書 (後掲) に示されるように、確率的シミュレータが空間的に均一な化学反応器10

(図1) をシミュレートするために使用される多くの段階に分けられる。化学反応器10は、一連の化学反応に関係する多様な種 (species) の制限されてはいるが十分な数の分子12を含んだ非常に少量の体積として説明することができる。温度、圧力および濃度などのこの体積の初期状態が、シミュレータのデータ記憶装置に記憶される (付属書、段階1のステップ (b) を参照)。許容反応経路およびその発生率 (ステップ

(a)) などのシステムの固有の特性も、複数のシステム・プロセス・アレイとして記憶装置に記憶される。プロセッサは、最初に初期状態とシステム・プロセス・アレイとから初期確率を計算し、次いで、統計的に一度に一つずつイベントを選択し、段階3に示されるステップの連続を繰り返し実行することにより、シミュレーションを伝搬する。それから、シミュレータは、プロセッサが段階3に示されるシミュレーション・ステップを完了した各タイム・ステップでの化学反応器の状態を表すデータ・グループを生成して、段階4でデータ記憶装置に記憶する。

【0008】図2A、2Bおよび2Cは、反応1、2、3という3つの化学反応を含む化学反応器10をシミュレートするためにバンカー等が使用したイベント選択操作を図式的に説明している。この3つの反応のそれぞれは、その反応1、2、3の反応速度定数、反応物の濃度、および生成物の濃度の関数として表される。

濃度とによって定義された反応率 $R_1$ 、 $R_2$ および $R_3$ を有する。反応率 $R_n$ は、1秒当たり発生する反応1~3の確率と考えられるので、(1秒当たりの)総確率 $P$ は和 $R_1 + R_2 + R_3$ となる。期間 $1/P$ で発生する任意のイベントの平均確率は1なので、その期間は単一のイベントに対するタイム・ステップとして解釈され、シミュレーションでの経過時間はその量だけ先に進められる

(図2B)。プロセッサは3つの反応の内の1つを選択するために乱数を使用する。その乱数値に応じて3つの化学反応のいずれかを選択でき(図2C)、所与の反応の選択尤度は、総確率 $P$ に対するその寄与分に等しい。これは、図2Cの線部分の長さで表される。

【0009】別の化学シミュレータがジレスピ(Gillespie)によって開発された。この場合、シミュレータは2個の乱数を生成し、その内の1個は化学反応を識別するために、もう1個はタイム・ステップの決定に使用される時間基準を正しく加重するために使われる(ジャーナル・オブ・コンピュータ・シミュレーション・フィジックス、1976年、第22巻、第4号、403-434ページ)。タイム・ステップは、個別のイベントそれぞれの発生確率によって動的に加重されるため、より優れた精度が得られる。

【0010】バンカーおよびジレスピによって発表された確率的シミュレータはともに均一シミュレータであり、空間的に均一なシステムのシミュレーションだけに使用できる。ジレスピは、まずシミュレーションの対象となるシステムを複数のサブボリュームに分割し、化学反応が複数のサブボリュームの中で「個別に」進行できるようにすることで、これらの確率的シミュレータの空間的に不均一な化学反応への応用の一般化を提案している。サブボリューム間での反応物および反応生成物の物質移動を、個別の化学反応ステップに使用される方法に類似した方法で確率に割り当てることが提案されている。3次元の確率関数を使用し、反応ステップと物理的位置とを反映しなければならない。提案されているシミュレータは、時間的にシステム全体に化学反応を伝搬するために、特定の反応ステップだけではなく特定のサブボリュームを確率的に選択することを必要とする。その結果、ジレスピによって提案されているシミュレータでは、それぞれサブボリュームの選択、反応タイプ、およびタイム・ステップの加重に使われる3つの無作為な選択プロセスを同時に処理しなければならない。提案されているシミュレータは特定のサブボリュームの選択とは独立に反応ステップを選択するので、無作為なタイム・ステップ加重プロセスの後で求められるタイム・ステップは、選択したサブボリュームによって束縛される可能性がある。したがって、このタイム・ステップは、他の反応ステップが選択された体積の反応率とは大幅に異なる反応率の他のサブボリュームには不適切となる可

システム全体に任意のタイム・ステップを定義するための共通した時間基準を決定するのは困難となる。ジレスピはこの制限を認識し、提案されたシミュレータの不均一な化学システムへの適用は、多様なサブボリュームの時間的展開での差が小さい非常に類似したサブボリュームを持った管状システムに限定されると述べている。

【0011】化学反応速度論の多様な離散シミュレーション技術は、J. ターナー(Turner)によって再検討されている(ジャーナル・オブ・フィジカル・ケミストリ、第81巻、第25号、2379-2408ページ、1978)。ターナーは、ジレスピが提案したシミュレータに特に言及して、空間依存型確率的シミュレーション法について簡略に説明し、基本的にはジレスピのそれに類似した一次元システムを拡張した方法を提案している。空間的に不均一な確率的シミュレータに広範囲な適用例があることは、当該技術分野の当業者にとっては明らかである。ただし、システムの複雑さにより、ならびに動的システムの変化を正確に追跡するための複数パラメータの無作為選択を同時に処理する必要性のため、三次元の空間的に不均一な確率的シミュレータは複雑かつ低速すぎるので実際には役に立たないことは広く理解されている。

【0012】

【発明が解決しようとする課題】したがって、本発明は、空間的に不均一なシミュレーション対象システムの正確なシミュレーション、予測または制御を行う機能を備えた確率的シミュレーション・システムを提供することを第1の目的としている。

【0013】本発明の第2の目的は、シミュレーションおよび予測が迅速に実行され、少なくとも1つのプロセッサを含むシミュレータがシミュレーション対象システムをリアルタイムで制御することができる空間的に不均一な確率的シミュレータを提供することである。

【0014】また、本発明の第3の目的は、複数の空間セルで発生する複数のイベントを同時にシミュレートし、シミュレータがシミュレーション対象システムの時間的に同期したシミュレーション、予測または制御を行うことができる確率的シミュレーション・システムを提供することである。

【0015】また、本発明の第4の目的は、数学的アルゴリズムの解を必要とせず、高水準なシミュレーション精度を維持しながらもシミュレーション対象システムのシミュレーション、予測または制御を迅速に実行できる確率的シミュレーション・システムを提供することである。

【0016】また、本発明の第5の目的は、詳細かつ綿密なシミュレーション前解析を行わなくても、多岐に渡る幾何学的構成、反応イベントおよび物質特性を持ったシステムに適用するために容易に構成可能な一般化され

ある。

# 【0017】

【課題を解決するための手段】要するに、実施例では、本発明は、データ相関装置を含んだ、少なくとも1個のデータ記憶装置を具備する時間進行型物質エネルギー・システムのシミュレーションおよび制御のいずれか一方または両方を行うためのシミュレータから成る。前記データ記憶装置に記憶される複数のデータ・グループには、幾何学的構成、システム状態、物質特性、物質エネルギー・プロセスおよび物質エネルギー・プロセスの発生確率を定義するために複数のデータが含まれている。これらのデータ・グループは、アレイ、リンクされたリスト、ルックアップ・テーブルまたは他の種類のデータ構造という形態を取る。データ相関装置は、データ・グループのすべてを相関させ、それによって物質エネルギー・システムを明示的な複数次元のデータ構造を必要とせずにデータ・グループによって表すことを可能とする少なくとも1個の関数関係リンクを定義することができる。さらに、シミュレータは、データ・グループのデータをデータ記憶装置から受信するためのデータ入力装置を含む少なくとも1つのプロセッサを具備し、そのプロセッサには、(a)可能な物質エネルギー・プロセスのそれぞれのイベント確率を計算し、前記物質エネルギー・プロセスのすべてを加算することによる総発生確率を使用してタイム・ステップを決定するステップ、(b)タイム・ステップの間に物質エネルギー・プロセス・イベントを無作為に選択し、選択した物質エネルギー・プロセスの発生に起因するシステム状態データを更新するために、物質エネルギー・プロセス、物質特性データおよび幾何学的構成データを使用するステップ、(c)予め定めたシミュレーション終了時間に至るまで前記のステップ(a)および(b)を繰り返すステップを含む、前記の複数のデータ・グループの中で関数関係リンクを利用するシミュレーション・プロセスを実行するための装置が備えられている。さらに、プロセッサには、時間進行型物質エネルギー・システムを制御するために、ステップ(b)のシミュレーション・プロセスで得られる更新されたシステム状態データを利用する機能を持った制御装置が設けられている。

# 【0018】

【実施例】図3Aは、4つのデータ・グループ、つまり、システム状態データ・グループ42、物質特性データ・グループ44、イベント確率データ・グループ46およびイベント・プロセス・データ・グループ48から成るデータ構造40を示す。システム状態データ・グループ42は、最初に、それぞれにサブボリューム・インデックス(INDX)が指定される複数のサブボリューム62(図4)を定義する。これらのサブボリュームは、図4に示されるような物質エネルギー・システムの

システム60が複数のサブボリューム62を含んでいる。さらに、システム状態データ・グループ42はその関連するサブボリューム・インデックス(INDX)によって識別される各々のサブボリューム62のシステム条件に関する情報を提供する。

【0019】対応するサブボリュームINDXによって定義されるサブボリューム62のそれぞれは複数の物質を包含し、各物質の特性は物質特性識別子(ID)によって識別される。図3に戻ると、物質特性データ・グループ44は複数のデータ・サブグループを含み、各サブグループは、その関連するサブボリュームINDXによって識別されるサブボリューム62の内の少なくとも1個に含まれる物質特性IDによって識別される物質特性を定義する。

【0020】イベント確率データ・グループ46には、サブボリュームINDXによって識別される少なくとも1個のサブボリューム62にそれぞれが関係付けられた一連のイベントであって、関連するサブボリューム62のシステム状態ならびに物質特性に応じたイベント確率を有する一連のイベントを一意的に識別するための複数のイベント番号を含む。イベント・プロセス・データ・グループ48には、関連するサブボリュームINDXにより識別される各サブボリュームでのシステム状態データ・グループ42によって、および物質特定データ・グループ44によって与えられるシステム条件からイベント確率を決定するための複数のプロセス関数が含まれている。

【0021】特に、実施例でのこれらのデータ・グループのそれぞれについて、以下に説明する。

【0022】1. システム状態データ・グループ42は、最初に、シミュレーションの規模についての幾何学的情報を表す複数のサブボリュームを定義する。各サブボリュームは均一であると仮定され、それが包含するシミュレーション粒子の数(シミュレーション・パラメータによって必要とされる化学種とエネルギーとの間で適切に配分される)、その温度(および適宜に圧力)、その大きさと形状、ならび物質エネルギー・システム60でのその位置に関する情報を与えられている。また、各サブボリュームには、さらに下記で説明する物質特性データ・グループ44へのリンクを経由して、その構成と特性を記述する1個または複数の物質IDが付加される。サブボリュームの全体的な構造は、静的(シミュレーション・プロセスの初めに決定され、以後そのまま変化しない)あるいは動的(サブボリュームの或る一定の領域は時間と共に変化することが許容されている)である。動的なサブボリュームが望ましい場合のシミュレーションの例としては、薄膜の化学蒸着のシミュレーションがある。サブボリュームの大きさは規則的でも、不規則でもよいが、2個の隣接するサブボリューム間で境界

サブボリュームはモノリシックでも、便宜上別個の領域に分けてもよい。例えば、互いに相対的に移動する2個のサブボリュームは、摩擦学的相互作用の効果のシミュレーションに使用可能である。別の例としては、レーザ加熱の実施例(図11と図12)においては、便利なこと、サブボリュームを異なる物質の層に分割することができる。さらに、1個または複数の個別の層を、その層内の個々のサブボリュームに別々の物質IDを割り当てることにより、パターン化したり、複合層となるように構成することが可能である。

【0023】2. 物質特性データ・グループ44には、物質エネルギー・システム60に存在する物質と化学種とを記述する基本的な物理情報および化学情報が含まれている。これらは都合に応じて編成することが可能で、それぞれのグルーピングは、サブボリュームならびにイベント確率データ・グループ46にリンクするために使用される適切なIDタグで識別される。指定可能な情報には、分子濃度、熱容量、熱伝導率、光学特性、密度、磁化率、放射率、圧縮率、透磁率などが含まれる。レーザ・ビームやガス・ジェットのようなエネルギー源および物質源についての幾何学的情報も含まれる。それぞれは、温度、光の波長、時間、圧力、化学的濃度、物質の相、局所的な電場、磁場および重力場に対して適切に依存する。新しい確率を更新しなければならない場合には、イベント確率データ・グループ46がデータ記憶装置から利用できる。この種のデータ構造の特定の特徴は、非常に複雑な依存状態を含んだ計算上のオーバーヘッドが、非常に単純な依存関係を含む場合や、物理的な特性が定数であると仮定する場合より、わずかに大きいだけであるという点である。これによって、異なったサブ

ボリューム内の個々のイベントを現実的に追跡できるようになる。物質特性データ・グループ44は、個別に作成することも、データ記憶装置に記憶することも、シミュレーション・プロセスまたはオンライン制御プロセスの一方または両方の期間に検索を行うために使用することも可能である。

【0024】3. イベント確率データ・グループ46は、予め定義された順序に従って編成されたイベント確率のサブグループから成り、シミュレーションのために選択されたすべてのイベントを含む。このデータ・グループは、各サブグループ・メンバーを1個のサブボリュームまたは1組のサブボリュームに割り当てることによって、サブボリュームにリンクされる。それぞれの種類のプロセスの確率は、1個または複数のサブグループに別個にリストすることができる。例えば、レーザ加熱の実施例では、エネルギーの吸収と熱の流れの確率は別個のアレイにリストされる。各サブボリュームは、そのINDXを介して1個または複数のイベント確率データ・グループ・メンバーにリンクされている。例えば、レー

とは別個のアレイに編成され、INDXはサブボリューム・アレイ・インデックスである。特定の確率アレイ要素は、その要素の確率アレイ・インデックスをINDXから計算する算術式を使ってアクセスすることができる。このようにして、確率グループ・メンバーと特定のプロセスを経験するサブボリュームまたは1組のサブボリュームとの間の単純な接続を維持することができる。他の状況では、確率を編成しINDXを定義する別の方法の方が有用となる可能性がある。別個の物理的なプロセスのそれぞれに個別のイベント確率サブグループを与える利点は、それによってイベントの明示的な選択がデータ構造40の構築時にシミュレートできるという点である。このようにして、1個または複数の同時のイベントの3次元シミュレーションを作成するために使用できる、非常に柔軟性に富んだ汎用シミュレータを実現することができる。確率データはその関連のサブボリュームINDXによって識別されるサブボリューム62にリンクされ、各サブボリューム62は1個または複数の物質特性IDで標識付けされているため、確率データ・グループ48は、確率の決定に利用できる「ライブラリ」であって、物質特性データ・グループ42によって定義されるサブボリュームのイベント・プロセスおよび特性に関する情報の「ライブラリ」に自動的にリンクされる。

【0025】4. イベント・プロセス・データ・グループ48には、プロセス確率を決定するための数理表現やデータベース・テーブルまたは他の種類の関係定義の組であるプロセス関数のすべてが含まれている。これらのプロセス関数は、拡散のように固定されたり、化学反応ステップや化学反応速度論のようなシミュレーション・プロセス以前にデータベース内に別個に記憶される場合がある。一般的には、これらのプロセス関数は、物質特性データ・グループ44からの物質に特殊なさまざまなパラメータ、およびシステム状態データ・グループ42によって提供されるシステム状態を使用することになる。イベント・プロセス・データ・グループは、物質エネルギー・システム60で発生する可能性がある下記のプロセスの内の1つまたはそれ以上のプロセスをシミュレートするように構築することができる：

- a. 化学変換
- b. 熱伝達
- c. 物質移動
  - ・ 拡散
  - ・ フロー
  - ・ 対流
  - ・ 電場の元での移動
  - ・ 磁場の元での移動
  - ・ 重力場の元での移動
  - ・ 遠心力場の元での移動
- d. 放射線の吸収、反射および放射

による圧縮

f. 位相変換

g. 放射性崩壊、変質

h. 機械力および摩擦力。

【0026】したがって、図3Bに示されるデータ構造40には、特に空間的に不均一な確率的シミュレータに有効なユニークな機能的特性がある。これらのデータ・グループの中で、リンクする関係は2個の共通する指示パラメータ、つまりサブボリュームINDXと物質特性IDによって行われる。これらの共通な指示パラメータを使用することにより、シミュレータには、イベント確率データ・グループ46を使って、異なるサブボリューム62で発生する物理イベントまたは化学イベントのタイプを初めに決定するための情報が提供される。1個または複数の物質IDで標識付けされたサブボリューム62でのイベントの発生に応じて、シミュレータには、イベント・プロセス・データ・グループ48に含まれているプロセス関数を使うことによりシステム状態データ・グループ42およびイベント確率データ・グループ46を更新するための物質特性データ・グループ44が提供される。

【0027】したがって、データ構造40はサブボリューム間での相互作用を明示的に且つ同時に管理しなくても、3次元の時間進行型物質エネルギー・システムを追跡するのに十分な情報をシミュレータに提供する。空間的に不均一な確率的シミュレータの複雑さは大幅に減少する。特に、システムを伝搬するために各タイム・ステップにおいてイベントを無作為に選択および追跡する場合に、平均時間内のシミュレータはまた、1組のサブボリューム62を暗示的に無作為に選択する。空間的に不均一な物質の分散および異なるサブボリューム62間のシステム条件による効果は、イベント確率データ・グループ46とシステム状態データ・グループ42との間のリンクINDXおよびシステム状態データ・グループ42と物質特性データ・グループ44との間のリンク物質IDを介して説明される。

【0028】確率的シミュレーションの空間的複雑性の減少という利点に加え、データ構造40は確率的シミュレータの構築に一層多くの柔軟性を与える。一般的には、確率的シミュレータには、基本的に(1)シミュレーション済みのトリガ・イベントの無作為選択、および(2)総確率に応じてタイム・ステップに基づいて選択されたイベントを用いたシステムの伝搬というステップを含むコア(core)操作がある。データ構造40によって柔軟性が与えられるので、ひとたび開発されると、このコア・シミュレーション操作の組はモジュール化されて様々なシステムのシミュレーションに適用することができる。異なったデータ・グループの組で表される物質エネルギー・システムのシミュレーションは、こ

る組のデータ・グループを含む異なったデータ構造40に適用することにより、都合よく達成できる。したがって、より包括的なシミュレータは、このコア・シミュレーション・モジュールをデータ構造40と結合し、シミュレータが1つのタイプのソフトウェアおよびハードウェアによる実施から別のタイプに容易に変換できるようにし、および/または、異なった物質エネルギー・システムをシミュレートするように構築される。

【0029】図5は、ソフトウェア/ハードウェア・システム70におけるデータ構造40の実際の実現形体である。システム状態データ・グループ42、物質特性データ・グループ44、イベント確率データ・グループ46およびイベント・プロセス・データ・グループ48を含むデータ構造40は、データ記憶装置71に記憶される。物質エネルギー・システム60をシミュレートするためのシミュレーション装置74を含むプロセッサ・システム72は、下記のステップから成る付属書の段階2と段階3に記述されるステップを実行するために使われる：

1. イベント確率データ・グループ46に定義される全イベントの初期確率を決定する
2. 総確率の関数としてのタイム・ステップを決定する
3. すべての確率の和が予め定めた値に等しくなるように、確率を正規化する
4. シミュレーション・トリガ・イベントを無作為に選択する
5. 選択したトリガ・イベントが発生すると、イベント・プロセス・データ・グループ48、物質特性グループ44によって与えられるデータ、およびシステム状態データ・グループ42によって与えられる既存のシステム状態を使用して、物質の濃度、温度、圧力その他のデータを含むシステム状態データ・グループ42を更新する
6. 物質特性データ・グループ44および更新されたシステム状態データ・グループ42の使用によりイベント確率データ・グループ46を更新する
7. シミュレーション・プロセスが完了するまで前記のステップ2-6を反復する。

【0030】プロセッサ・システム72上で実現されるシミュレーション装置74は、ソフトウェアまたはハードウェアによる、あるいは任意の組み合わせの実現形体が可能である。プロセッサ・システム72は、データ記憶装置71にリンクして、データ記憶装置71との間でデータを送受信するデータ・バス73を有する。さらに、ソフトウェア/ハードウェア・システム70には、表示用の表示装置76と、ソフトウェア/ハードウェア・システム70にコマンドを送信するためのユーザ・インタフェース・システム77と、データ/コマンド接続ライン79を介し接続される物質エネルギー・システム60を制御する制御装置78とが備えられている。

れるシステム状態データ・グループ42を更新するためにシステム60からセンサおよび測定信号を受信することができる。ユーザ・インタフェース77を介して、ソフトウェア／ハードウェア・システム70のオペレータは、シミュレーション装置74に、シミュレーション・ステップの数、化学的濃度とエネルギーとを表す粒子の数、表示装置に送るための濃度の空間分布、温度、圧力その他のシステム・パラメータを含む表示データの表示間隔などの制御パラメータを提供することができる。

【0031】シミュレーション装置74が、物質エネルギー・システム60のシステム性能をシステム60でのプロセス・イベントの現実的な物理的伝搬より速く伝搬できる場合に、ソフトウェア／ハードウェア・システム70によって、物質エネルギー・システム60の動作をオンラインでリアルタイムに制御することができる。言い替えると、シミュレーション装置74がシステムの伝搬に使用されるタイム・ステップより短い期間内にシミュレーション・ステップおよび予測ステップを完了できる場合には、システム・オペレータ、または制御装置78は物質エネルギー・システム60のリアルタイム操作の制御にシステム性能予測を使用することができる。

【0032】シミュレーション・プロセスは本発明でさらに単純化され、ソフトウェア／ハードウェア・システム70を用いて物質エネルギー・システム60をリアルタイムでオンライン制御するという目的を達成するために、より高速なシミュレーション速度を達成する。シミュレーション速度は、データ構造40によって提供される関係定義を利用し、予め定めた順序でイベント確率データ・グループ46を配列することで、確率的選択プロセスを1次元選択プロセスに還元することにより、さらに高速化できる。

トリガ・イベントを各サブボリュームで無作為に選択し、この無作為に選択したイベントをジレスピによって提案された空間的に不均一なシステムで同時に追跡する代わりに、予め定めた固定順序で並べられた全サブボリューム内のイベントのすべてを含んだイベント確率データ・グループ46のサブグループは単一のエンティティとして処理される。全サブボリューム内の全イベントの確率がタイム・ステップを求めるために加算されるので、単一のエンティティとして処理を行うと、システム全体に対して一つの時間基準を確立することができる。各イベント確率の値は、各サブボリューム内でのシステム状態の変化に起因して、タイム・ステップのそれぞれにおいて変化する可能性があるが、イベント確率データ・グループ46によって定義されるイベント確率の「スタック順序 (stacking order)」は変更されないまま維持される。システム・シミュレーションの伝搬は、シミュレーション装置74が全イベント確率を含むイベント確率データ・グループ46の中から各タイム・ステ

るという単純化されたプロセスによって、さらに迅速に実行できる。これは、多くのサブボリュームを含む空間的に不均一なシステム60に対して達成可能であり、この場合、各サブボリュームは異なるイベント確率、物質濃度、反応率、温度、圧力などを有する。これは、関係定義、つまり、各イベント確率間のリンクを1個または複数のサブボリューム62に、したがって、システム状態データ・グループ42によって提供されるシステム特性の組や物質特性IDによる物質特性の組に与えるサブボリュームINDEXが存在するためである。

【0033】従来の確率的シミュレーションと異なり、シミュレーション装置74は、無作為にイベントをイベント確率データ・グループ46から選択する場合に、その選択したイベントがすべてのサブボリューム内のその関連するイベント確率を伴う状態の変化を引き起こすという一般的な前提に基づいてはシステム伝搬の処理を行わないため、さらに高速なシステム伝搬も達成される。代わりに、選択したイベントは、サブボリュームINDEXの組によって識別される特定の組のサブボリュームと関係付けられ、シミュレーション装置74は別のサブボリュームが選択されたトリガ・イベントによって影響されるかどうかを判断するための十分な情報を有する。システム状態データ・グループ42の更新は、従来のシミュレータで一般的に実行されるような全システムではなく、限定された数のサブボリュームに対してのみ実行される。

【0034】以上の利点を示す1つの明確な例が図6～8に示されている。この場合、システム80 (図8) は同時に化学反応、物質移動および熱流を受けている。図を簡略化するため、システム80は図2に示されるのと同じ3つの化学反応をこらむだけではなく、 $3 \times 3 \times 3$ のサブボリュームのアレイ (図8) 内に物質移動と熱移動とを取り込んでいる。システム80の可能な全プロセスのイベント確率は、図6に示される16個の確率アレイの組に収集される。このアレイは下記から成る：

1. 特定のサブボリュームでの3つの化学反応のそれぞれの相対的な確率 ( $3$ つの化学反応  $\times 27$ 個のサブボリューム、即ち81個の項)
2.  $x$ 方向、 $y$ 方向または $z$ 方向に垂直な18個のサブボリューム・インタフェースのいずれかを横切る $x$ 方向、 $y$ 方向または $z$ 方向の4つの化学種 (A. . D) のいずれかの物質移動の相対的な確率 ( $4 \times 3 \times 18$ 、即ち216個の項)
3.  $x$ 方向、 $y$ 方向または $z$ 方向に垂直な18個のインタフェースのいずれかを横切る $x$ 方向、 $y$ 方向または $z$ 方向の熱移動の相対的な確率 ( $3 \times 18$ 、即ち54個の項)。

【0035】. このようにしてプロセスを独立の確率アレイに分類すると、特定のシミュレーションに含まれるベ

ボリウムまたは一対のサブボリウムの間のインタフェースと16個の確率アレイのそれぞれの中の特定のものととの間に、サブボリウムINDXを使う直接的な対応が存在する。図8では、この対応が2個のサブボリウム間のインタフェースを横切るz方向の移動という特定のケースに対して示されている。例えば、z移動の確率アレイ・メンバーPgの値は、 $x=2$ 、 $y=2$ 、 $z=1$ の位置でのサブボリウムを $x=2$ 、 $y=2$ 、 $z=2$ の位置でのサブボリウムに移動する場合の確率を示している。(221)をソース・サブボリウムのINDXとし、Pgを選択したイベントの確率であると仮定すると、INDXは図に示される対応方程式を使って数9から求められる。この特定の対応は、図6のアレイTAZ、TBZ、TCZ、TDZおよびHZに当てはまる。他の対応は、異なったサブボリウムまたはサブボリウム・インタフェースが関係してくるので、他のプロセス確率データ・グループ・メンバーに対して確立される。

【0036】イベント選択プロセスにおいて、バンカー等やジレスピに従って行われるように各確率アレイを別個に考察するのではなく、16個の確率アレイをすべて順次に収集し、このアレイの集合体を全体として考察する。この16個のアレイの総確率を計算し、タイム・ステップがこの総確率から計算される。乱数が生成され、その乱数以上の小計が検出されるまで、確率アレイ要素が順次に加算される。このようにして選択した確率アレイ要素がそのタイム・ステップに対して選択したイベントを決める。例えば、これは、2つのサブボリウム間のy方向の種Bの移動に対応するアレイTBYのメンバーである。乱数の値に応じて、16個の確率アレイの351個の要素の内の任意のものを選択することができる。所与のイベントの選択尤度は、総確率Pに対するその寄与分に等しい。これは、図7の線分の長さで表される。

【0037】シミュレーション装置74およびデータ構造40によって提供される柔軟性とモジュラー組織によって、ソフトウェア／ハードウェア・システム70がさまざまなプロセッサとデータ記憶装置の構成で実現できるようになる。より迅速なシミュレーション伝搬プロセスとデータ記憶容量が増大された高速プロセッサ・システムとを利用すると、図5に示されるようなオンライン・システム60のリアルタイム制御を行うことができる。このような実施の例として以下に実施例を説明する。

【0038】図9は、複数の反応物で反応器を満たすための入口弁302、反応物の消費分が予め定めた率、例えば92パーセントに達した後に反応器300から排出するための出口弁304、および、その中の反応物を加熱するために化学反応器の底部に配置された複数の加熱

応率と反応物の消費は、化学反応器300システム内の温度分布に依存している。92パーセントという反応物消費の最適レベルは、過剰な副産物が作られないようにするためである。化学反応器システム300の6個のサブボリウム310の温度分布を監視する6個の温度センサ308があり、この6個のセンサ308から得られる温度測定値は、アナログ／デジタル変換器312によってデジタル信号へ変換される。その後、このデジタル信号は温度入力としてオンライン・プロセス制御シミュレータ320に入力される。シミュレータ320は、温度信号を初期条件としてシミュレーション前に受信し、且つオンライン制御プロセスの最中に定期的に受信して、システム・データ・グループ322を定期的に更新する。また、シミュレータ320は付属書に説明されるシミュレーション・ステップを実行し、時間の関数として反応物消費率を予測する。シミュレータ320は、予め定めた最適レベルの消費の終了時点も予測する。最適レベルの消費に到達する前に、化学反応器制御装置330に出力信号が与えられ、予測した時点に出口弁304を自動的に開き、化学反応器300で生成された産物を排出すると共に、再充てんプロセスを開始して化学反応器システム300を再起動する。オンライン・プロセス制御シミュレータ320を使って最適反応終了レベルを維持しながら、さらに複雑な設計の温度制御の使用を回避することができる。シミュレータ320および制御装置330が温度分布の監視および制御を行っている場合、化学反応器は反応物のより広範囲の初期温度に適用することができるので、さらに柔軟性に富んだ操作も行うことが可能である。

【0039】図11は、図9に示される化学反応器システム300に類似した化学反応器、シミュレータおよび反応器制御装置を備える別の化学反応器システム400を示す。化学反応器システム400では、或る反応率を得るために加熱器408がシミュレータ420と反応器制御装置430とにより制御されるという点で、化学反応器システム400は化学反応器システム300と異なる。温度センサ412から温度信号を受信してから、シミュレータ420はシステム状態データ・グループを更新するだけではなく、既存の温度分布に基づいて特定の反応率を得るための温度特性を予測する。予測した温度特性は化学反応器制御装置に伝送されて加熱器408を調整し、それによって化学反応器システム400の反応率および生産時間を能動的に制御することができる。加熱器制御機構を化学反応器制御装置に付加することにより、生産時間の制御をさらに正確に行うことができる。

【0040】図11は物質エネルギー・システム500を示しており、レーザ・ビーム502によりシステム500の頂面が照射されてシステムへのエネルギー入力、つまり熱の流れQを生成する。熱の流れQは、その上に

学特性の関数である。入射レーザ・ビーム502のエネルギーはIで表され、温度依存反射率はR(T)によって表される。ここで、Tは温度である。隣接するセルへの熱伝達率は、温度依存型熱伝導率K(T)、第1のサブボリュームと第2のサブボリュームとの温度差、サブボリューム間の接触面積Aおよびこの2個のサブボリュームの中心間の距離dに依存する。或るサブボリュームの瞬間のエンタルピーQが、 $T=Q/C_p M$ という関係に従ってその温度を決定する。ここで、 $C_p$ は熱容量、Mはサブボリューム内の物質のモル数である。

【0041】図12は、複数のサブボリューム510に分割される物質エネルギー・システム500を示す。サブボリューム510は、2次元座標を使用できるように円柱対称形である。物質エネルギー・システム500は、その厚さがサブボリュームの厚さに等しい1個または複数のスライスから成る3つの異なった層、つまり層520、層522および層524の物質を含む。すべての光線は上段スライス512に吸収される。上段スライス512の中心に近いサブボリューム内でのエネルギー変化率は、熱源であるレーザ・ビーム502から遠く離れたサブボリューム510を上回ると考えられている。物質特性データ・グループは、上段スライス512の温度依存型反射率であるR(T)に情報を提供し、熱伝導率K(T)、密度 $\rho$ および熱容量 $C_p$ は3つの層520、522および524のそれぞれに提供される。シミュレータは時間の関数として温度分布を予測する。物質エネルギー・システム500は、レーザ・ビーム502が上段スライス512に加えられる基板(図示せず)上に蒸着された3つの層の物質を含む薄膜であり得る。シミュレータ540を使うことで、レーザ・ビーム502を生成するレーザ源550を制御し、薄膜のシステム500の3つの層520、522、524の予め定めた温度特性を作成することができる。

【0042】図13~15で示されるシミュレーション結果を調べると、物質エネルギー・システム500内の温度特性を図12に示される実施例に従って正確に制御することができる。図13は、シミュレータ540を使って実行した温度計算の結果と、銀のパルス状赤外線レーザ加熱のための熱拡散方程式の解析解により得られた結果との比較である。解析解は、フィジカル・レビュー・レターズ、1988年、第61巻、第22号の2588-2591ページにJ. M. ヒックス(Hicks)等により開示されている。シミュレータ540で 사용되는物質パラメータおよびビーム・パラメータは、解析解で使われるものと同じである。プロットされた結果は、その上にレーザ・ビーム502が完全に入射され、吸収される上段スライス512の真中のサブボリュームの時間依存型温度である。その半径は0.9mmで、その厚さは27nmである。

測される温度の結果と、シリコンのcw可視レーザ加熱の解析解との比較である。解析解は、ジャーナル・オブ・アプライド・フィジックス、1985年、第57巻、第12号、5123-4126ページにラリオカピス(Lariokapis)等により開示されている。両方の解ともシリコンの時間依存型の熱特性と光学特性とを活用し、上段スライス512、つまりシリコン表面での温度分布を比較している。確率的シミュレーションのいくつかの空間的構造の結果が示されている。

10 【0044】図15は、大型シリコン・ウェハー上のCr、MoおよびWから成る厚さ2 $\mu$ m、直径25-50 $\mu$ mの膜をcwレーザ加熱する場合の温度分布の予測結果を示す。(MW/c 単位の)さまざまなレーザ出力での各金属の上段スライス512の結果が示されている。純金属の領域と炭素および酸素によって汚染された金属の領域とを区切る縦の点線は実験データと比較するためのもので、Crヘキサカルボニル、MoヘキサカルボニルおよびWヘキサカルボニルからレーザ化学蒸着での清浄な金属膜を得るための最低温度を決定する役割を果たす。金属の光学特性は温度独立型であると仮定され、金属およびシリコン基板の熱特性のすべてが温度依存型であった。

【0045】

【発明の効果】本発明により、シミュレーションされた空間的に不均一なシステムを正確にシミュレーション、予測または制御する機能を備えた確率的シミュレーション・システムを提供することができる。

【0046】また、本発明により、シミュレーションおよび予測が迅速に実行され、それによって少なくとも1つのプロセッサを具備するシミュレータがシミュレーション対象システムをリアルタイムで制御できる空間的に不均一な確率的シミュレータを提供することができる。

【0047】また、本発明により、複数の空間セルで発生する複数のイベントを同時にシミュレートし、それによってシミュレータはシミュレート対象システムを時間的に同期してシミュレート、予測または制御を行うことができる確率的シミュレーション・システムを提供することができる。

【0048】また、本発明により、数学的アルゴリズムの解を必要とせず、それによって高水準なシミュレーション精度を維持しつつ、シミュレート対象システムのシミュレート、予測または制御を行うことができる確率的シミュレーション・システムを提供することができる。

【0049】詳細かつ綿密なシミュレーション前解析を必要とせず、さまざまな幾何構造、反応イベントおよび物質特性を持ったシステムに適用するために容易に構成可能な一般化された確率的シミュレーション・システムを提供することができる点も本発明の利点である。

【0050】

# 付属書

## 均一な化学反応の確率的シミュレーション

### 1. 以下を入力する。

- 【0051】 (a) 反応ステップおよび率の定数  
(b) 初期濃度、温度および圧力

### 2. シミュレーションをセットアップする。

- 【0052】 初期確率を計算する。  
【0053】 3. シミュレーションを伝搬する。  
【0054】 タイム・ステップを計算する。  
【0055】 確率を正規化する。  
【0056】 乱数を求める。  
【0057】 反応ステップを選択する。  
【0058】 濃度を更新する。  
【0059】 (可変の場合) 温度および圧力を更新する。

- 【0060】 確率を更新する。

- 【0061】 4. 以下を出力する。

- 【0062】 経過時間に対する濃度、温度および圧力

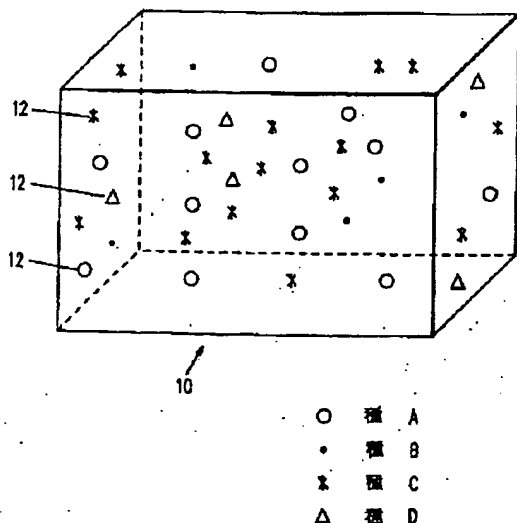
### 【図面の簡単な説明】

【図1】 多くの異なる種の分子を含んだ均一な物質エネルギー・システムの斜視図である。

【図2】 図2A、2B、2Cは、均一な化学反応に対するイベント選択操作を説明する図で、図2Aは反応ステップおよび率の法則を示し、図2Bは確率および経過時間の計算を示し、図2Cは乱数を使ったイベント選択を示す図である。

【図3】 図3A、3Bは4つのデータ・グループを含んだデータ構造を示す図であり、サブボリューム・インデックス (INDEX) および物質特性識別子 (ID) がこのデータ・グループ間のリンクを提供する。

【図1】



【図4】 多くのサブボリュームを含む3次元物質エネルギー・システムを示す。

【図5】 本発明に係わるシミュレータを利用するソフトウェア/ハードウェア・オンライン制御システムの概略図である。

【図6】 本発明に係わるシミュレータに設立された確率アレイを示す図である。

【図7】 イベント選択操作の概略図である。

【図8】 セルの対と確率アレイ・メンバーとの間の対応を示すためにテーブルと変換式が含まれる、セルの3×3×3のアレイに分割された3次元物質エネルギー・システムを示す図であり、前記対応は、サブボリュームをイベント確率サブグループにリンクするのにどのように INDEX を使用するかを示す例である。

【図9】 シミュレータ・システムによって制御される化学反応器を示す図である。

【図10】 予め定めた反応率を達成するためにシミュレータ制御装置によって制御される別の化学反応器を示す図である。

【図11】 レーザ・ビームから入力されるエネルギーを受け取る物質エネルギー・システムを示す図である。

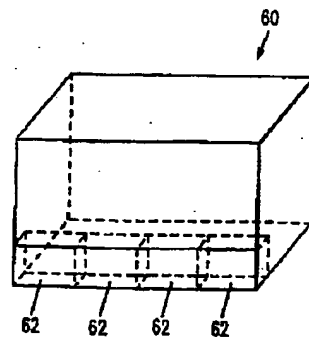
【図12】 本発明に係わるオンライン・シミュレータによって制御される図11の物質エネルギー・システムを示す図である。

【図13】 本発明の実施例で行った時間依存型温度計算を従来の計算と比較した図である。

【図14】 本発明の実施例で計算した空間温度分布を従来の計算と比較した図である。

【図15】 本発明の実施例を使用して2層システムに対して計算した空間温度分布の例を示す図である。

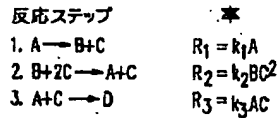
【図4】



【図2】

均一な化学反応に対するイベントの選択

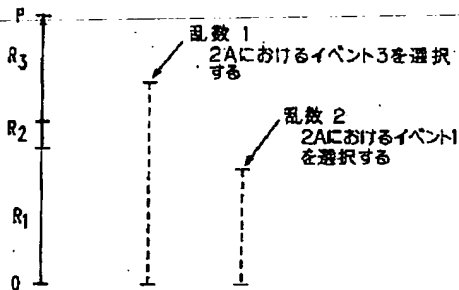
2A



2B

率 = 確率, 秒<sup>-1</sup>  
 $R_1 = P_1$   
 $R_2 = P_2$   
 $R_3 = P_3$   
 総確率, P, 秒<sup>-1</sup>  
 $P = P_1 + P_2 + P_3$   
 タイム・ステップ, t, 秒  
 $t = 1/P$   
 新しい時間 = 古い時間 + t

2C



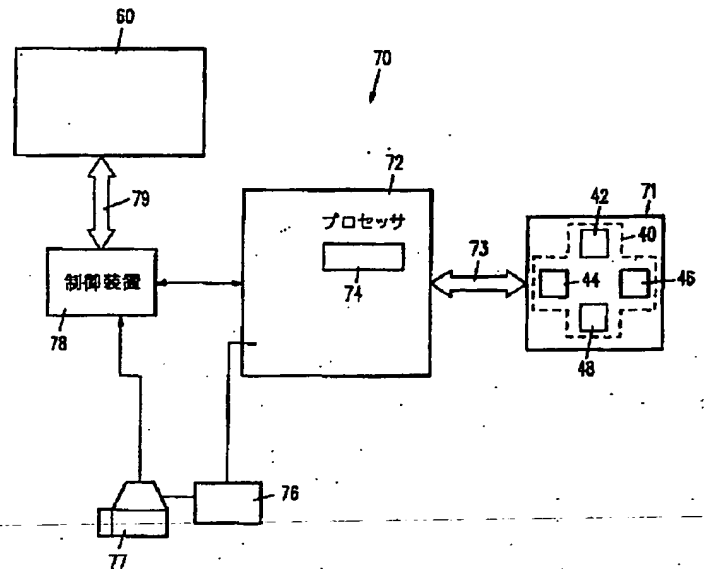
【図6】

立方体 (3 × 3 × 3の立方体, 3つの反応ステップ) で  
 化学反応, 物質移動 および熱流のシミュレーション  
 でイベントを選択する

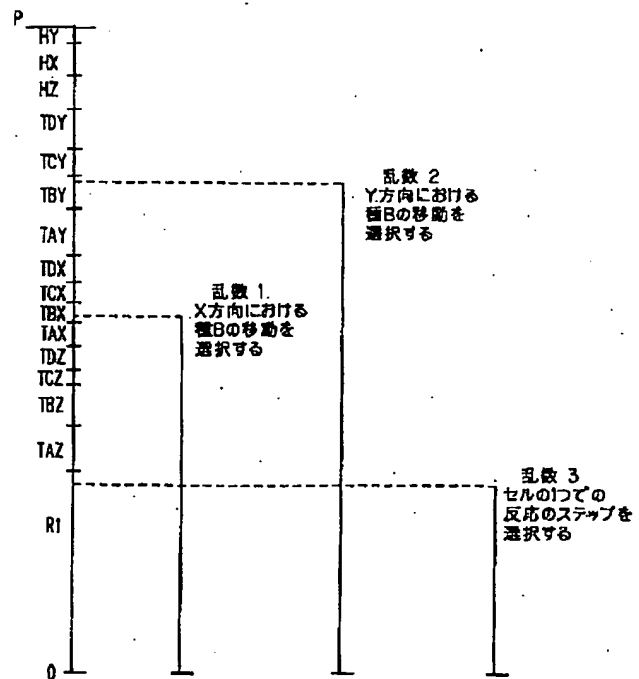
確率アレイ

1. 化学:  $R_{111} \rightarrow R_{211} \rightarrow R_{311}$  (81要素)
2. 物質移動, 種 A, Z 方向:  $TAZ_{111} \rightarrow 112$  (18要素)
3. 物質移動, 種 B, Z 方向:  $TBZ_{111} \rightarrow 112$  (18要素)
4. 物質移動, 種 C, Z 方向:  $TCZ_{111} \rightarrow 112$  (18要素)
5. 物質移動, 種 D, Z 方向:  $TDZ_{111} \rightarrow 112$  (18要素)
6. 物質移動, 種 A, X 方向:  $TAX_{111} \rightarrow 211$  (18要素)
7. 物質移動, 種 B, X 方向:  $TBX_{111} \rightarrow 211$  (18要素)
8. 物質移動, 種 C, X 方向:  $TCX_{111} \rightarrow 211$  (18要素)
9. 物質移動, 種 D, X 方向:  $TDX_{111} \rightarrow 211$  (18要素)
10. 物質移動, 種 A, Y 方向:  $TAY_{111} \rightarrow 121$  (18要素)
11. 物質移動, 種 B, Y 方向:  $TBY_{111} \rightarrow 121$  (18要素)
12. 物質移動, 種 C, Y 方向:  $TCY_{111} \rightarrow 121$  (18要素)
13. 物質移動, 種 D, Y 方向:  $TDY_{111} \rightarrow 121$  (18要素)
14. 熱移動, Z 方向:  $HZ_{111} \rightarrow 112$  (18要素)
15. 熱移動, X 方向:  $HX_{111} \rightarrow 211$  (18要素)
16. 熱移動, Y 方向:  $HY_{111} \rightarrow 121$  (18要素)

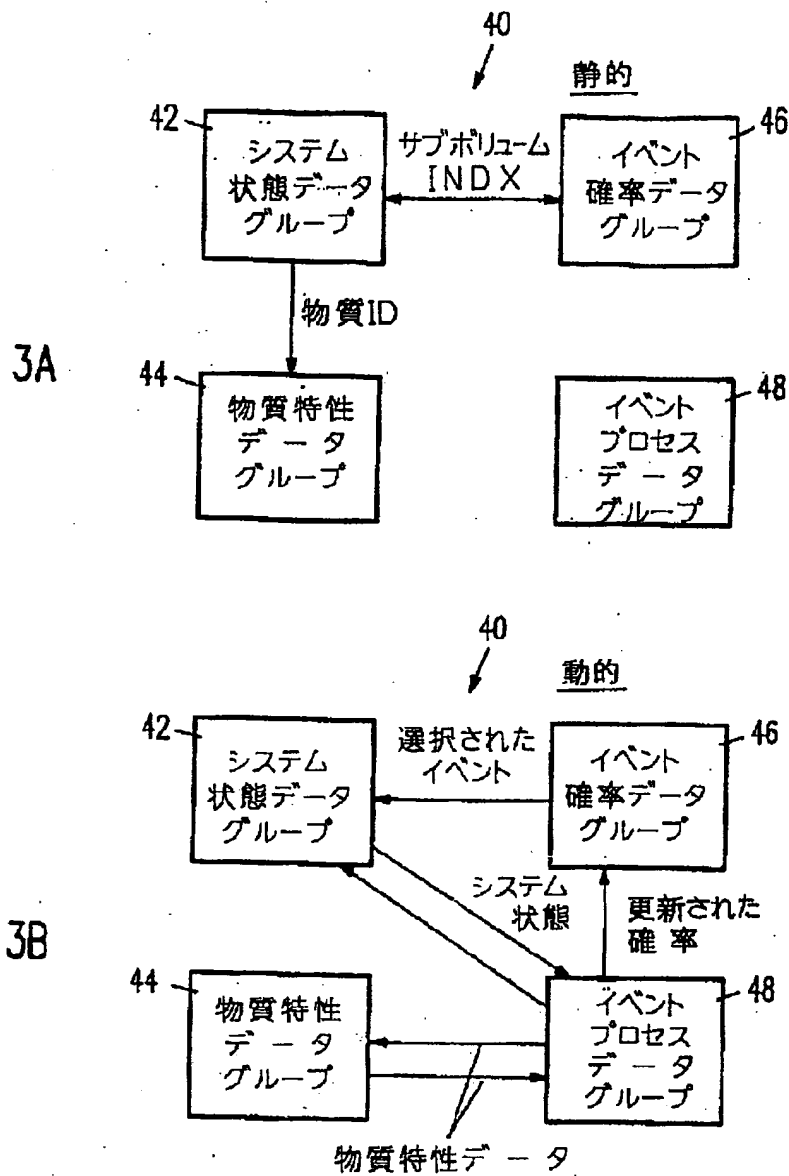
【図5】



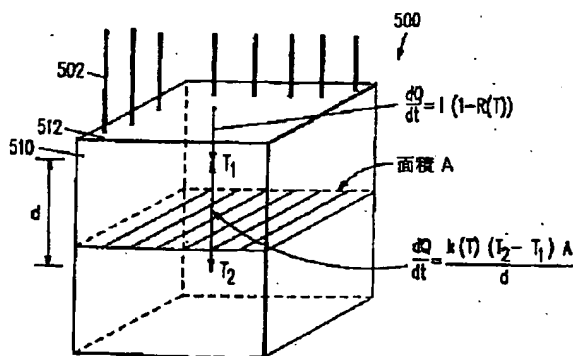
【図7】



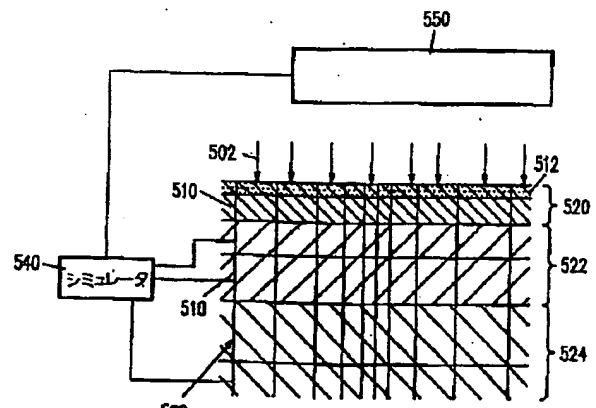
【図3】



【図11】

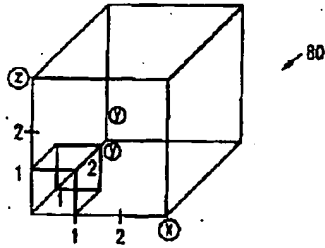


【図12】



【図8】

3次元シミュレーション用の空間格子



例:  $xyz \rightarrow x'y'z'$  セル対に対する確率  
Z方向での移動

$P_1, P_2$	$111 \leftrightarrow 112 \leftrightarrow 113$
$P_3, P_4$	$121 \leftrightarrow 122 \leftrightarrow 123$
$P_5, P_6$	$131 \leftrightarrow 132 \leftrightarrow 133$
$P_7, P_8$	$211 \leftrightarrow 212 \leftrightarrow 213$
$P_9, P_{10}$	$221 \leftrightarrow 222 \leftrightarrow 223$
$P_{11}, P_{12}$	$231 \leftrightarrow 232 \leftrightarrow 233$
$P_{13}, P_{14}$	$311 \leftrightarrow 312 \leftrightarrow 313$
$P_{15}, P_{16}$	$321 \leftrightarrow 322 \leftrightarrow 323$
$P_{17}, P_{18}$	$331 \leftrightarrow 332 \leftrightarrow 333$

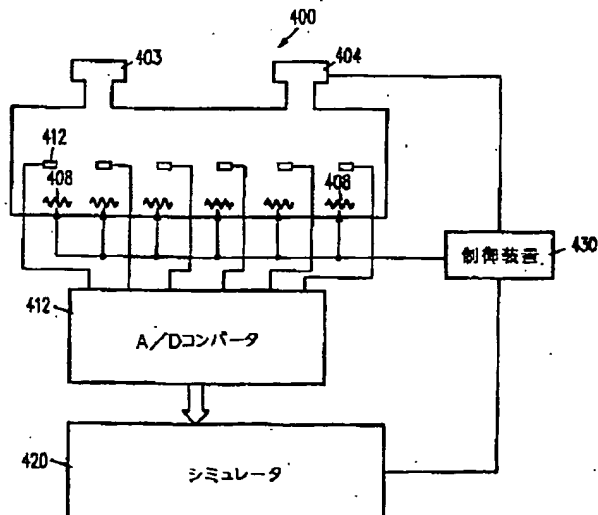
XYZからXY(Z+1)への移動の確率 $P_n$ に対して  
(ポリウム80の境界内)

$$x = [(n-1) \div 6] + 1$$

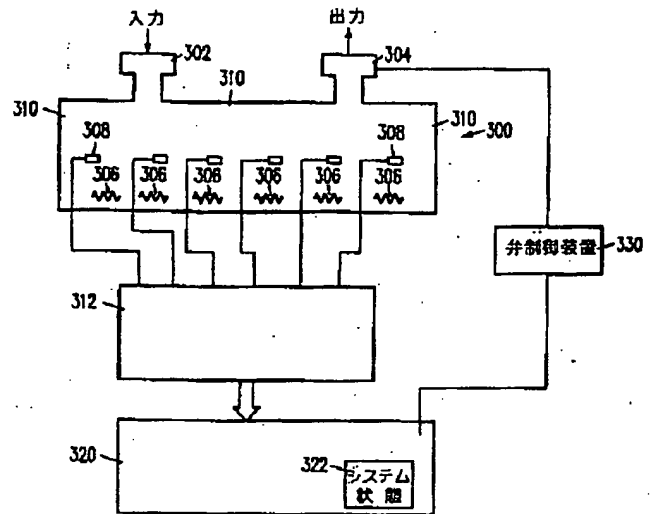
$$y = [([(n-1) \div 2] \bmod 3) + 1]$$

$$z = [(n-1) \bmod 2] + 1$$

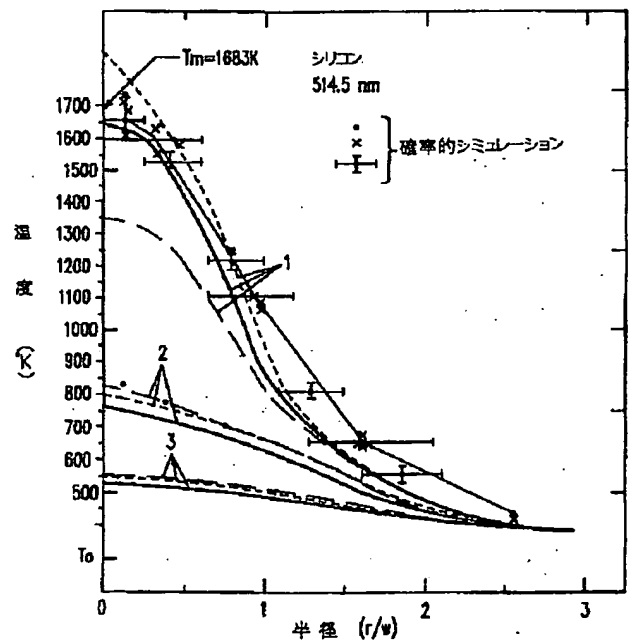
【図10】



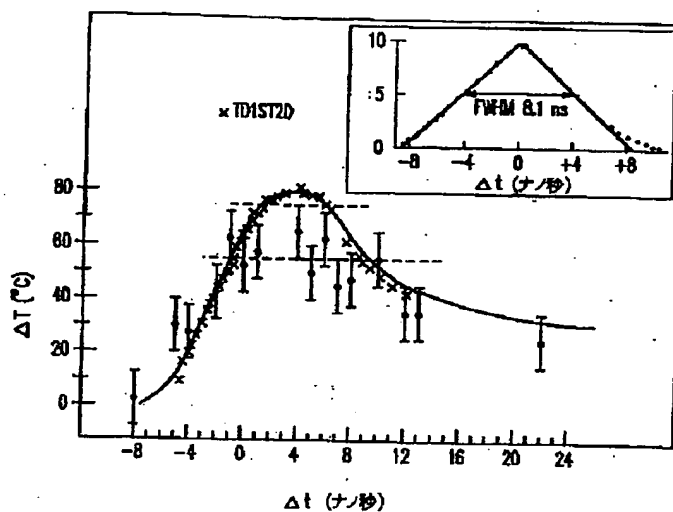
【図9】



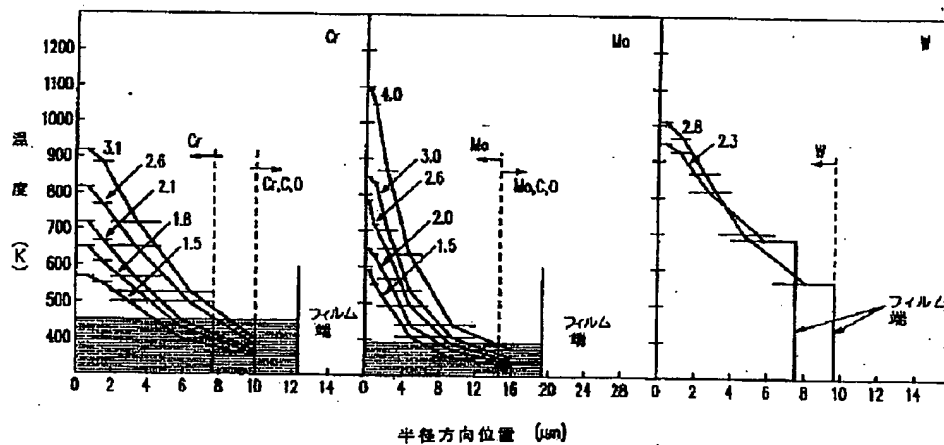
【図14】



【図13】



【図15】



フロントページの続き

(72)発明者 ウィリアム・ディー・ヒンスバーグ、ザ・サード  
アメリカ合衆国94539、カリフォルニア州  
フレモント、ラデロ・ストリート  
40635番地

(72)発明者 フランシス・エイ・ハウル  
アメリカ合衆国94539、カリフォルニア州  
フレモント、ラデロ・ストリート  
40635番地